



TITLE:

自由エネルギーと自己相互作用粒子系(「数学者のための分子生物学入門」-新しい数学を造ろう-,研究会報告)

AUTHOR(S):

鈴木, 貴; 赤迫, 清司; 伊賀, 達成; 堀江, 将仁

---

CITATION:

鈴木, 貴 ...[et al]. 自由エネルギーと自己相互作用粒子系(「数学者のための分子生物学入門」-新しい数学を造ろう-,研究会報告). 物性研究 2005, 85(1): 66-76

ISSUE DATE:

2005-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110354>

RIGHT:

## 「自由エネルギーと自己相互作用粒子系」

鈴木 貴 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

レクチャーノート作成: 赤迫 清司、伊賀 達成、堀江 将仁 (阪大院基工)

### Abstract

多数の自己重力粒子系平均場の集中質量は、空間次元が2の場合には  $8\pi$  に量子化する。この事実の証明には、その背景となるいくつかの数理原理から自然に導出される数学的技法の適用と吟味が必要である。これらは統計力学ヒエラルヒーにおける数学原理、非線形量子力学、量子化する爆発機構、双対変分原理であり、これによって近年確立された非線形偏微分方程式論における弱収束の方法が本質的に新しい思想のもとで展開されることが示された。本講演の目的は、この理論の背景となる、ヒエラルヒー、創発性などの統計力学、システムバイオロジーの原理を動機付けとして、その数学的な証明のストーリーと方法を解説するとともに、関連する課題である場の形成、凝縮など、数理医学、古典的場の理論、平均場理論における諸問題に対する数学的研究の一端を紹介することである。

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (\nabla u - u \nabla v) \\ 0 = \Delta v - av + u & \text{in } \Omega \times (0, T) \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} - u \frac{\partial v}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, T) \end{cases}$$

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$  : 有界領域     $\partial\Omega$ : 滑らか、     $a \geq 0$  定数

$$\begin{cases} j = -\nabla u + u \nabla v \dots u = u(x, t) \text{ の流量} \\ u_t = -\nabla \cdot j \dots \text{質量保存} \\ j \cdot \nu = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, T) \end{cases}$$

$$u = u(x, t) \geq 0$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u = \int_{\Omega} u_t = \int_{\Omega} -\nabla \cdot j = - \int_{\partial\Omega} \nu \cdot j = 0$$

$$\|u(t)\|_1 = \|u_0\|_1 \equiv \lambda$$

$$j = -\nabla u + u \nabla v$$

$u = u(x, t)$ : 密度、 $v = v(x, t)$ : 濃度、  
細胞性粘菌

$u = u(x, t) \geq 0$  自己重力粒子の平均場 (密度)  
 $v = v(x, t)$  : 粒子の作る場

$$v(x, t) = \int \Gamma(x - y) u(y, t) dy$$

ただし、

$$\Gamma(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{|x|} & (n=3) \\ \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{|x|} & (n=2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\Delta v = u & \text{in } \Omega, & v = 0 & \text{on } \partial\Omega \\ -\Delta v + av = u & \text{in } \Omega, & \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega \\ -\Delta v = u - \int_{\Omega} u & \text{in } \Omega, & \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega, & \int_{\Omega} v = 0 \end{cases}$$

輸送自己動粒子系 (物理)、走化性 (生物)、スモルコフスキー方程式 (化学) はそれぞれ相関性がある。

## 場の形成

$$v(x, t) = \int_{\Omega} G(x, y) u(y, t) dy \quad \text{物理的}$$

$$\frac{\partial v}{\partial(\tau^{-1}t)} = \tau v_t = \Delta v - av + u \quad \text{in } \Omega, \quad \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad \tau > 0 : \text{緩和時間}$$

## 自由エネルギー

$$u_t = \nabla \cdot (\nabla u - u \nabla v) = \nabla \cdot [u \nabla (\log u - v)] \quad u = u(x, t) > 0$$

$$\begin{cases} \int_{\Omega} u_t (\log u - v) = - \int_{\Omega} u |\nabla (\log u - v)|^2 \leq 0 \\ \int_{\Omega} u_t \log u = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u (\log u - 1) \\ \int_{\Omega} u_t v = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |(-\Delta + a)^{-\frac{1}{2}} u|^2 = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} uv = \frac{d}{dt} \frac{1}{2} \int \int_{\Omega} G(x, y) u(x, t) u(y, t) dx dy \end{cases}$$

$$F(u) =: \int_{\Omega} u (\log u - 1) - \frac{1}{2} \int \int_{\Omega \times \Omega} G(x, y) u(x) u(y) dx dy$$

$$\frac{d}{dt} F(u(t)) = - \int_{\Omega} u |\nabla (\log u - v)|^2 \leq 0$$

この性質を持つように問題設定されている。

# Collapse の形成

*Kellen – Segal* 1970 生物モデル

*Nanjundiah* 1973 ...  $u(x, t)dx$  有限時間で  $\delta$ -関数を形成 ... 爆発

*Childress – Percoss* 1981  $n=2$  解の爆発、 $\lambda = \|u_0\|_1$  と  $8\pi$  との関係。

## なぜ $8\pi$ か ... 平衡状態の全体像

$$u = u(x), \text{ ” } \frac{d}{dt} F(u) = 0 \text{ ”}$$

$$\begin{cases} \log u - v = \text{定数} \\ \text{未定定数} \\ \|u\|_1 = \lambda \end{cases}$$

$$\Rightarrow u = \frac{\lambda e^v}{\int_{\Omega} e^v}$$

$$\begin{cases} -\Delta v + av = \frac{\lambda e^v}{\int_{\Omega} e^v} & \text{in } \Omega, & \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega \\ \text{c.f. } -\Delta v = \frac{\lambda e^v}{\int_{\Omega} e^v} & \text{in } \Omega, & v = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

$$\begin{cases} \lambda = \|u_0\|_1 < 8\pi \Rightarrow T_{max} = +\infty \\ \|\exists u_0\|_1 > 8\pi \Rightarrow T_{max} < +\infty \end{cases} \quad (\#)$$

*Jager – Luckhaus* 1992

$$\begin{cases} \|u_0\|_1 \ll 1 \Rightarrow T_{max} = +\infty \\ \|\exists u_0\|_1 \gg 1 \Rightarrow T_{max} < +\infty \end{cases}$$

*T.Nagai* 1995  $(\#) O.K. \text{ if } u = u(x, t)$

$n=2$  non-radically symmetric

*Nagai–Senba–Yoshida* 1997

*Bilen* 1998  $\|u_0\|_1 < 4\pi \Rightarrow T_{max} = +\infty$

*Gajewski–Zacharias* 1998

主定理

$n = 2$   $T_{max} < +\infty$   $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ :有界,  $\partial\Omega$ :滑らか

$$u(x, t) dx \xrightarrow{t \rightarrow T_{max}} \sum_{x_0 \in S} m(x_0) \delta_{x_0}(dx) + f(x) dx$$

$$S =: \{x_0 \in \bar{\Omega} | \exists x_k \rightarrow x_0, \exists t_k T, u(x_k, t_k) \rightarrow +\infty\} \quad \text{爆発集合}$$

*Collapse* の形成

$$0 \leq f = f(\lambda) \in L^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega} \setminus S)$$

$$m(x_0) = m_*(x_0) =: \begin{cases} 8\pi & (x_0 \in \Omega) \\ 4\pi & (x_0 \in \partial\Omega) \end{cases} \quad \text{mass quantization}$$

$$2\sharp(S \cap \Omega) + \sharp(S \cap \partial\Omega) \leq \frac{\|u_0\|_1}{4\pi}$$

爆発点の分類

$$x_0 \in S \text{ が type I} \quad \Leftrightarrow \forall k > 0, \quad \overline{\lim}_{t \rightarrow \tau} R(t)^2 \|u(\cdot, t)\|_{L^1(\Omega \cap B(x_0, bR(t)))} < +\infty$$

$$\text{i.e. } \forall b > 0, \quad \overline{\lim}_{t \rightarrow \tau} \sup_{x \in \Omega, |x-x_0| \leq bR(t)} R(t)^2 u(x, t) < +\infty$$

”遅い concentration”

そうでない時

Type II

$$\exists b > 0, \overline{\lim}_{t \rightarrow T} \sup_{x \in \Omega, |x-x_0| \leq bR(t)} R(t)^2 u(x, t) = +\infty$$

R Type II の blowup point

… ”sub-collapse” を形成

$$\begin{aligned} z(y, s) &= (T-t)u(x, t) \rightharpoonup m_*(x_0)\delta_0(dy) \quad \text{in } M(\mathbf{R}^2) \\ y &= \frac{(x-x_0)}{(T-t)^{1/2}} \\ s &= -\log(T-t) \end{aligned}$$

Type I 爆発点は創発的

$$F(u) = \int_{\Omega} u(\log u - 1) - \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} G(x, y) u(x) u(y) dx dy$$

... local free energy

$$\forall b > 0, \quad \lim_{t \rightarrow T} F_{bR(t)}(u(t)) = +\infty$$

Herrero-Velazquey ... Type II

$$0 < r(t) \ll R(t)$$

$\Omega \subset \mathbf{R}^2$  有界領域,  $\partial\Omega$  滑らか

$$\begin{aligned} u_t &= \nabla \cdot (\nabla u - u \nabla v) & \text{in } \Omega \times (0, T) \\ 0 &= \Delta v - v + u & \text{in } \Omega \times (0, T) \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} &= \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, T) \\ u|_{t=0} &= u_0(x) \geq 0 & \text{in } \Omega \end{aligned}$$

$$\|u(\cdot, t)\|_1 = \|u_0\|_1 = \lambda$$

$$\frac{d}{dt}F(u(t)) + \int_{\Omega} u \, |\nabla(\log u - v)|^2 = 0$$

$$F(u) = \int_{\Omega} u(\log u - 1) - \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} G(x, x') u \otimes u dx dx'$$

$$\|u_0\|_1 = \lambda < 4\pi \Rightarrow T_{\max} = +\infty$$

Tridinger-Moser 不等式

$$\begin{aligned} W^{1,p} &\hookrightarrow L^{p^*} & \frac{1}{p^*} &= \frac{1}{p} - \frac{1}{n} & (1 < p < n) \\ &\hookrightarrow C^\alpha & \alpha &\in (0, 1) & (p > n) \end{aligned}$$

$$W^{1,n} \hookrightarrow \text{Orlicz 空間}$$

$$n=2 \quad \Omega \subset \mathbf{R}^2 \quad \text{有界} (\partial\Omega \text{ 滑らか})$$

$$H^1_0 = W^{1,2}_0(\Omega)$$

$$H^1 = W^{1,2}(\Omega)$$

$$\int_{\Omega} e^{4\pi w^2} \leq C \quad (w \in H^1_0, \|\nabla w\|_2 \leq 1)$$

$$v = w \cdot \|\nabla v\|^2 \leq 4\pi w^2 + \frac{1}{16\pi} \|\nabla v\|^2$$

$$\int_{\Omega} e^v \leq C \exp\left(\frac{1}{16\pi} \|\nabla v\|_2^2\right)$$

$$\log \left( \int_{\Omega} e^v \right) \leq \frac{1}{16\pi} \|\nabla v\|^2 + K \quad (\forall v \in H_0^1(\Omega)) \dots \text{Onofri}$$

Moser の不等式

$$\int_{S^2} e^{4\pi w^2} \leq C \quad \left( w \in H^1(S^2), \int_{S^2} w = 0 \right)$$

Onofri の不等式

$$\log \left( \int_{S^2} e^v \right) \leq \frac{1}{16\pi} \|\nabla v\|_2^2 \quad \left( v \in H^1(S^2), \int_{S^2} v = 0 \right)$$

Chang-Yang(1987,1988)

$$\log \left( \int_{\Omega} e^v \right) \leq \frac{1}{8\pi} \|\nabla v\|_2^2 + K \quad \left( v \in H^1(\Omega), \int_{\Omega} v = 0 \right)$$

$$\log \left( \int_{\Omega} e^v \right) \leq \frac{1}{8\pi} \|\nabla v\|_2^2 + \int_{\Omega} v + K \quad (\forall v \in H^1(\Omega)) \quad (1)$$

双対 Trudinger-Moser 方程式

$\Omega \subset \mathbf{R}^2$  有界領域,  $\partial\Omega$  滑らか,  $G = G(x, x')$

$\Rightarrow$

$$\inf \left\{ \int_{\Omega} u(\log u - 1) - \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} G(x, x') u \otimes u dx dx' \mid u \geq 0, \|u\|_1 = 4\pi \right\} > -\infty \quad (2)$$

(1)  $\leftrightarrow$  (2)

Legendre 変換

”双対変分原理”

$$\begin{aligned} F(u) &= \int_{\Omega} u(\log u - 1) - \frac{1}{2} \iint_{\Omega \times \Omega} G(x, x') u \otimes u dx dx' \\ &\leq F(u_0) \end{aligned}$$

$$\|u\|_1 = \lambda < 4\pi$$

$\Rightarrow$

$$\int_{\Omega} u(\log u - 1)(t) \leq C \quad (0 \leq t < T)$$

エネルギー法

$$\|u(\cdot, t)\|_p \leq C_p \quad (0 \leq t < T)$$

Moser's iteration scheme

$$\|u(\cdot, t)\|_{\infty} \leq C \quad (0 \leq t < T)$$

$\Rightarrow$

$$T = T_{\max} = +\infty$$



時間大域解の存在条件を空間的に局所化

$$x_0 \in S \quad \varphi = \varphi_{x_0, R'} \cdot R(x)$$

$$u(x, t) \varphi$$

nice cut-off function

Formation of collapse

$$u(x, t) dx \longrightarrow \sum_{x_0 \in S} m(x_0) \delta_{x_0}(dx) + f(x) dx \quad \text{in } M(\overline{\Omega})$$

$$m(x_0) \geq m_*(x_0)$$

... 爆発点が全て孤立していれば nice cut-off function の導入によって解決

爆発点の孤立-nice cut-off function

↑

爆発点の有限性 local energy method

Gagliardo-Nirenkey

$$\exists \varepsilon_0 > 0 \quad \overline{\lim}_{t \rightarrow T} \|u(t)\|_{L^1(\Omega \cap B(x_0, R))} < \varepsilon_0 \Rightarrow x_0 \notin S$$

$$x_0 \in S \Rightarrow \overline{\lim}_{t \rightarrow T} \|u(t)\|_{L^1(\Omega \cap B(x_0, R))} \geq \varepsilon_0$$

空間局所  $L^1$  ノルムは時間について有界変動

爆発条件

$$x_0 \in \partial\Omega, \|u_0\|_1 > 4\pi, \int_{\Omega} |x - x_0|^2 u_0(x) dx \ll 1 \Rightarrow T_{\max} < +\infty$$

$o \in \Omega$  star-shaped

$$u_t = \nabla(\nabla u - u \nabla v)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} - u \frac{\partial v}{\partial \nu} \Big|_{\partial\Omega} = 0$$

$$v(x, t) = \int_{\Omega} \Gamma(x - y) u(y, t) dy$$

$$\Gamma(x) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{|x|}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} |x|^2 u(x, t) dx = \int_{\Omega} |x|^2 \nabla(\nabla u - u \nabla v)$$

$$\begin{aligned}
&= - \int_{\Omega} 2x(\nabla u - u\nabla v) \\
&= -2 \int_{\partial} \Omega(x, \nu)u + \int = \Omega 4u dx + 2 \int_{\Omega} ux \cdot \nabla v \\
&\leq 4\lambda + 2 \int_{\Omega} \int_{\Omega} u(x, t)x \cdot \nabla_x \Gamma(x - y) + y \cdot \nabla_y \Gamma(x - y) \\
&= 4\lambda + \int \int_{\Omega \times \Omega u(x, t)} \{x \cdot \nabla_x \Gamma(x - y) + y \cdot \nabla_y \Gamma(x - y)\} u(x, t)u(y, t) \\
&= 4\lambda - \frac{\lambda^2}{2\pi} < 0 (\lambda > 8\pi)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(x, t)\phi &= - \int_{\Omega} (\nabla u - u\nabla v) \\
&= - \int_{\Omega} u\Delta\phi + \int_{\Omega} u\nabla\phi \cdot \nabla v \\
&= - \int_{\Omega} u\Delta\phi + \frac{1}{2} \int \int_{\Omega \times \Omega u(x, t)} P_{\phi}(x, x')u \otimes u dx dx'
\end{aligned}$$

$$\phi \in C^2(\overline{\Omega}), \frac{\partial \phi}{\partial \nu}|_{\partial \Omega} = 0$$

$$|\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u\phi| \leq CR^{-2} (0 < R < 1)$$

量子化とは爆発条件の量子化で、post blow up continuation から mass quantization であるが、これでは示すことが出来なかった。

無限時間爆発 collapse の量子化は OK

back self-similar transformation

$$\begin{aligned}
y &= (x - x_0)/(T - t)^{\frac{1}{2}} \\
z(y, s) &= (T - t)u(x, t) \\
s &= -\log(T - t) \\
z_s &= \nabla \cdot (\nabla z - z\nabla w - yz/2) \\
0 &= \Delta w + z - ae^{-s}w \\
\frac{\partial z}{\partial \nu} &= \frac{\partial w}{\partial \nu} = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p &= w + |y|^2/4 \\
\begin{cases} z_s = \nabla \cdot (\nabla z - z\nabla p) \\ \nabla w = \int \dots\dots\dots z dy \end{cases}
\end{aligned}$$

$$s_n \rightarrow +\infty$$

$$\begin{aligned} \exists s'_n \subset s_n \quad s, t, \quad z(y, s + s'_n) dy \rightarrow \mu(dy, s) \in c_*(-\infty, \infty, M(R^2)) \\ \mu(dy, s) = \sum_{y_0 = \beta_s} m_*(y_0) \delta_{y_0}(dy) + g(y, s) dy \end{aligned}$$

無限に大きい parabolic region は爆発機構を包絡する。

$$\begin{aligned} \left| \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(x, t) \phi_{x_0, R, 2R}(x) dx \right| &\leq CR^{-2} \\ \left| \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(x, t) \phi_R(x) dx - \int_{\Omega} u(x, t) \phi_R(x) dx \right| &\leq CR^{-2}(T-t) \\ R &= b(T-t)^{\frac{1}{2}} \\ b &\rightarrow \infty \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{b \rightarrow \infty} \sum_{t \rightarrow T} |||u(t)|||_{L^1(\Omega \cap b(x_0, bR(t)))} - m(x_0) &= 0 \\ \sum_{b \rightarrow 0} \sum_{t \rightarrow T} \int_{\Omega} u(x, t) \phi_R(x) dx &= m(x_0) \\ \sum_{b \rightarrow \infty} \sum_{t \rightarrow T} \int_{\Omega} u(x, t) \phi_{bR(t)}(x) dx &= m(x_0) \end{aligned}$$

rescaled limit eq'n の弱解の存在から、

$$\begin{aligned} m(x_0) &= \mu(R^2, s) \leq m_*(x_0) \\ R^2 m_*(x_0) &\geq \int_{R^2} (R^2 - |y|^2)_+ \mu(dy, s) \\ \frac{d}{ds} \int_{R^2} (R^2 - |y|^2)_+ \mu(dy, s) &\geq \dots \end{aligned}$$

Kurokiba-Ogawa

forward self-similar transformation から、 $0 < R \leq 2$  の条件をはずせる。

## 参考文献

- [1] T.Senba , T.Suzuki Applied Analysis Mathematical Method in Natural Science ,Imperial College Press
- [2] G.Tarantello , ANALYTICAL ASPECTS OF LIOUVILLE-TYPE EQUATIONS
- [3] Gilberg D.,Trudinger N.S.,Elliptic partial defferential equations of second order. Springer Verlag
- [4] M.Struwe,G.Tarantello ,On Multivoltex Solution in Chern-Simons Gauge Theory ,Boll.U.M.I (8) 1-B (1998)P109-P121
- [5] H.Brezis , F.Merle , Uniform estimates and blow up behavior for solutions of  $-\Delta u = V(x)e^u$  in two dimensions ,Comm. P.D.E.,16(1991),1223-1253
- [6] Li Y.Y., Shafrir I.,Blow up analyasis for solutions of  $-\Delta u = V(x)e^u$  in dimation two. Ind. Univ. Math. Jour. 43 (1994) no. 4, 1255-1270